



چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

بررسی جذب هیدروژن در زئولیت FAU- ANA – MFI – ROH

علی سالاری پور¹، احمد ملایی²، دانیال لطفی مقدم^{3*}، منا خدایی پور⁴

¹ گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر، ایران، alisalaripour110@gmail.com

² گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین (ع)، ایران، a.mollaei@merc.ac.ir

³ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه امام حسین (ع)، ایران، lotfi.dani70@yahoo.com

⁴ گروه مهندسی شیمی، دانشگاه اه صنعتی سهند تبریز، ایران، m.khodaei_68@yahoo.com

چکیده

زئولیت ها به عنوان جاذب برای حذف آلاینده ها دارای ظرفیت جذب خوب و ساختار پایدار می باشند که به صورت طبیعی و مصنوعی در دسترس هستند و دارای خواص ساختاری منحصر به فرد و نسبت سطح به حجم بالا و تخلخل زیاد هستند. میزان جذب هیدروژن در زئولیت در محدوده دمایی 80 تا 100 درجه کلوین و فشار 0.001 تا 100 کیلوپاسگال، توسط روش شبیه سازی مونت کارلو بررسی شده است. پتانسیل استفاده شده در این کار شامل کولمبیک، لنارد جونز و باکینگهام است. نتایج نشان می دهد که تأثیر سطح و فضای داخلی نانوزئولیت ها بر مقدار جذب هیدروژن به خوبی تأثیر دما و فشار است.

کلمات کلیدی: هیدروژن، نانوزئولیت، جذب، شبیه سازی مونت کارلو

Study of hydrogen adsorption in zeolite FAU- ANA – MFI – ROH

Alisalaripour , ahmad mollaei , denial lotfi moghadm , mona khodaei pour

ABSTRACT

Zeolites as adsorbents for the removal of contaminants with good absorption capacity and stable structure, which are natural and synthetic are available. And has unique structural properties and high surface to volume ratio and high porosity. The amount of hydrogen adsorption in zeolite at a temperature range of 80 to 100 k and pressure of 0.001 to 100 kpa methods Monte Carlo simulation have been investigated. The zeolite potential used in this work is that used It contains two-body Coulombic, Lennard-Jones, and Buckingham terms. The results show that the impact surface and the interior Nanozeolite on the amount of hydrogen absorption as well as the effect of temperature and pressure.

KEYWORDS:

Hydrogen , Nanozeolite , absorption , Monte Carlo simulation

1- مقدمه

مورد بحث و بررسی بوده است. استفاده از هیدروژن به صورت سوخت در موتور اتومبیل ها و توربین هواپیماها، یکی از کاربردهای مهم آن

با کاهش منابع سوخت های فسیلی، استفاده از هیدروژن به منزله یک منبع انرژی دوستدار محیط زیست از گذشته تا به حال

* lotfi.dani70@yahoo.com

* 09357032203